

УДК 539.21

**С. В. Фенский, П. В. Захаров \***

Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет  
им. В. М. Шукшина, г. Бийск

\*zakharovpvl@rambler.ru

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ НА ГРАНИЦЕ Ni–Al ПРИ ИНТЕНСИВНОМ ВНЕШНЕМ ВОЗДЕЙСТВИИ

В работе методом молекулярной динамики исследуется поведение дислокаций несоответствия на границе биметалла Ni–Al. Показана динамика изменения дислокационной структуры от условий внешнего периодического воздействия. Выявлены структурные особенности изменений границы биметалла от частоты и амплитуды воздействия.

*Ключевые слова:* дислокация несоответствия, биметалл, метод молекулярной динамики, ударные волны, нелинейная динамика

**S. V. Fenskii, P. V. Zakharov**

## MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF MISFIT DISLOCATIONS AT THE Ni-Al BOUNDARY UNDER INTENSE EXTERNAL ACTION

The molecular dynamics method is used to study the behavior of misfit dislocations at the boundary of Ni–Al bimetal. The dynamics of changes in the dislocation structure due to external periodic exposure is shown. The structural features of changes in the boundary of the bimetal on the frequency and amplitude of exposure are revealed.

*Key words:* misfit dislocation, bimetal, molecular dynamics method, shock waves, nonlinear dynamics

Структурные изменения материалов при интенсивных внешних воздействиях различной природы вызывают большой интерес в связи с развитием ряда высокотехнологических отраслей науки и техники. В первую очередь это исследования материалов, используемых при проектировании реакторов и космических аппаратов.

Особый интерес вызывает соединение Ni и Al. Такие биметаллические частицы имеют широкое применение, например, для получения многослойных углеродных нанотрубок из полипропилена [1] и других соединений [2]. Биметаллические нанокластеры имеют практическое значение для формирования токовых и потенциальных контактов в элементах электроники в связи с тем, что работа выхода электронов сильно зависит от реальной структуры биметаллов. Кроме того, тонкие покрытия Ni–Al активно используются для реактивного химического срачивания (бондинга) полупроводниковых структур в многослойные интегральные схемы с целью повышения плотности упаковки отдельных элементов за счет реализации трехмерной архитектуры [3]. Также в ряде наших работ обсуждается близкая тематика [4–6].

Рассматриваемая нами модель представляет собой объемный ГЦК-кристалл биметалла Ni–Al (рис. 1), который содержит  $50 \cdot 10^3$  частиц, взаимодействующих посредством потенциала, полученного методом погруженного атома (EAM-потенциал).

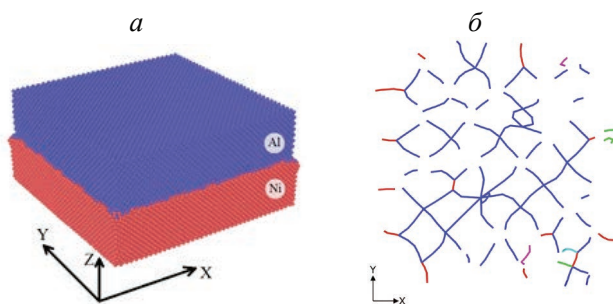


Рис. 1. Модель биметалла Ni–Al:

*a* — трехмерный вид модели с обозначением зоны воздействия, зоны поглощения энергии и демпфера; *б* — сетка дислокаций несоответствия на границе металлов, где синие дислокации типа  $1/2 \langle 110 \rangle$ , зеленые —  $1/6 \langle 112 \rangle$  (Шотки), розовые —  $1/6 \langle 110 \rangle$  (stair-rod), красные — прочие

Полная энергия  $E$  кристалла в этом случае может быть выражена как:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \varphi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i), \quad (1)$$

где  $\varphi_{ij}$  представляет парную энергию между атомами  $i$  и  $j$ , отделенными друг от друга расстоянием  $r_{ij}$ , а  $F_i$  — энергия вложения, связанная

с вложенным атомом  $i$  в локальном местоположении с электронной плотностью  $\rho_i$ .

Электронную плотность можно рассчитать по формуле:

$$\rho_i = \sum_{j, j \neq i} f_j(r_{ij}). \quad (2)$$

где  $f_j(r_{ij})$  — электронная плотность участка атома  $i$ , находящегося на расстоянии  $r_{ij}$  от атома  $j$ .

Моделирование осуществлялось посредством пакета LAMMPS. На модель ГЦК кристалла вдоль осей  $X$ ,  $Y$  накладывались периодические граничные условия, вдоль оси  $Z$  — свободные. Вдоль оси  $X$  направление  $\langle 100 \rangle$ ,  $Y$  —  $\langle 010 \rangle$ ,  $Z$  —  $\langle 001 \rangle$ . Полученная модель была разделена на три блока. Блок I представлял собой 3–4 слоя атомов, которые осуществляли колебания по гармоническому закону. Периодическое воздействие применялось ко всем атомам из блока I. Далее находился блок II — поглотитель энергии, в том числе и граница металлов. В части III расчетной ячейки выделялся блок из 4–5 слоев атомов, жестко зафиксированных, выполняющих роль демпфера, рис. 2.

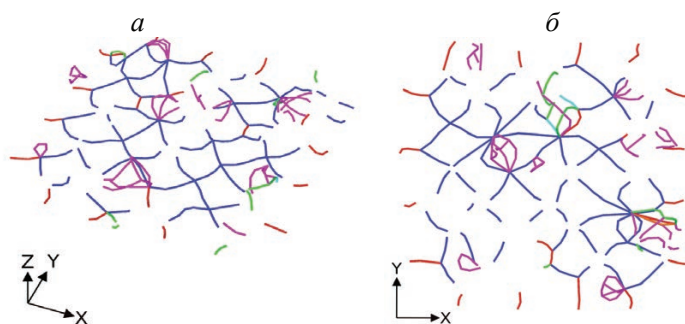


Рис. 2. Визуализация дислокационной структуры биметалла Ni–Al:

$a$  — объемный вид через 250 пикосекунд эксперимента и частоте воздействия 5 ТГц,  $b$  — вид в плоскости XOY через 400 пикосекунд эксперимента и частоте воздействия 8 ТГц

Установлено, что при интенсификации воздействия большая часть дислокационных сегментов перемещается в Al в виде дислокаций типа stair-rod. Это обусловлено соотношением упругих модулей компонент сплава Ni–Al, а также ориентацией кристаллических решеток.

*Работа выполнена по гранту при финансовой поддержке РФФИ и Алтайского края в рамках научного проекта № 18–42–220002 р\_а.*

### **Литература**

1. Ni–Al bimetallic catalysts for preparation of multiwalled carbon nanotubes from polypropylene: Influence of the ratio of NiAl / Y. Shen [et al.] // *Applied Catalysis B: Environmental* 2016. V. 181. P. 769–778.
192. Synergistic Effect in Bimetallic Ni–Al Clusters. Application to Efficient Catalytic Reductive Dehalogenation of Polychlorinated Arenes / F. Massicot [et al.] // *Tetrahedron*. 2000. V. 56, Is. 27. P. 4765–4768.
193. Широкопад Д. В., Корнич Г. В., Буга С. Г. Моделирование взаимодействия двудольных биметаллических кластеров с низкоэнергетическими кластерами аргона // *Физика твердого тела*. 2017. Т. 59, вып. 1. С. 189–199.
194. Моделирование прохождения ударных волн через границу раздела двудольных биметаллических частиц Ni–Al / П. В. Захаров [и др.] // *Письма о материалах*. 2017. Т. 7, № 3 (27). С. 296–302.
195. Кооперативное поведение межузельных атомов в поле дислокаций несоответствия на границе биметалла Ni–Al / П. В. Захаров [и др.] // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2012. Т. 9, № 4. С. 431–435.
196. Изучение посредством двумерной модели возможности существования нелинейных локализованных колебаний на границе биметалла Pt–Al / М. Д. Старостенков [и др.] // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2011. Т. 8, № 4. С. 40–44.